Искусственный интеллект, физическое обоснование химической связи и синтез новых веществ.

Безверхний Владимир Дмитриевич.

Украина, e-mail: bezvold@ukr.net

Резюме: Учитывая физическое обоснование химической связи как стоячей волны де Бройля валентных электронов, вполне возможно точное теоретическое описание химической связи (молекул), которое приведет к отказу от реального синтеза веществ. Синтез всех теоретически возможных новых веществ, практически невозможен ввиду недостаточности материи. Поэтому, в будущем, синтез неизбежно переместится в виртуальную реальность, где его будет производить ИИ. Но, для этого нужно строгое описание химической связи.

Ключевые слова: Химическая связь, стоячая волна де Бройля, синтез веществ, количество веществ, искусственный интеллект, виртуальная реальность.

ВСТУПЛЕНИЕ.

Прежде чем приступить к обсуждению, давайте вспомним немного истории, в том числе теорию резонанса Л. Полинга.

“…Важно понимать, что в реальности резонансных структур не существует, а теория резонанса — это просто очень удобная и наглядная модель для описания бензола.

Понятие “резонанс” (в теории резонанса Л. Полинга) не предполагает реально происходящего резонанса между структурами Кекуле, это просто хорошее название теории. Удачное, потому что ясно указывает на то, что при резонансе структур Кекуле образуется реальная молекула бензола, имеющая промежуточную между ними электронную структуру (структуры Кекуле).

И самое главное, особо отмечу, что реальная структура бензола будет иметь энергию ниже энергии структур Кекуле (именно поэтому “теория резонанса” - это уменьшение энергии системы, а как известно при реальном резонансе (как физический процесс), можно сказать происходит “выброс” энергии).

...теория резонанса распространилась не только на бензол, но и на химические связи... по сути, это был единственный системный подход к описанию химической связи. И, несмотря на то, что в строго теоретическом плане (в рамках квантовой механики) теория резонанса противоречит принципу квантовой суперпозиции, идея резонанса (то есть, представления о реальном физическом процессе) как подход к изучению химической связи очень успешна и плодотворна.

Поскольку именно представление о резонансе ясно указывает на то, что в образовании химической связи должна быть “изюминка”, то есть реальный физический процесс, приводящий к выделению энергии (энергии связи).

Классическое, современное представление о химической связи фактически игнорирует физическое обоснование химической связи. Согласно современным представлениям, нет причин, по которым энергия должна выделяться при образовании химической связи. Наоборот, при концентрации электронов в межъядерной области, то есть при образовании химической связи, логично ожидать увеличения энергии системы (увеличивается кулоновское отталкивание между электронами)...

Л. Полинг провел один год (1926 - 1927) в Европе, в альма-матери квантовой механики. Фактически он изучал квантовую механику у А. Зоммерфельда (Мюнхен) и на семинарах Э. Шрёдингера (Цюрих), и великие физики, стоявшие у истоков квантовой механики, оказали на него глубокое влияние.

После этой короткой (всего 1 год) командировки Л. Полинг понял, что только квантовая механика может быть теоретической основой для понимания химической связи. Более того, теперь очевидно, что физическая сущность, физическое обоснование различных процессов для него стали жизненно важными, поэтому в будущем родилась теория резонанса. Здесь необходимы некоторые пояснения.

В 20 - 30-е годы 20 века, после рождения квантовой механики, многие великие физики пытались решить проблему химической связи. Но все их попытки были неудачными, вернее, не очень успешными.

Но это не следует воспринимать как провал, напротив, они четко обозначили проблему: если причина образования химической связи объясняется реальным физическим процессом (очевидно, так и должно быть), то приемлемое решение невозможно найти...

Теория резонанса — это “чисто” химическая теория, из идеи которой следует, что должен существовать физический процесс (реальный), являющийся причиной образования химической связи, мы предполагаем, что поэтому Полинг назвал теорию “теорией резонанса”. И можно не сомневаться, что только такой подход приведет к полному пониманию химической связи.

Для этого необходимо одновременно применять квантовую механику и теорию относительности А. Эйнштейна... Вероятно, это единственный путь... не очень простой, но, пожалуй, единственный, который приведет к пониманию как химических, так и многих физических процессов.

Насколько удачно применение понятия реального физического процесса, можно показать на следующем примере. В 1935 году в статье Лайнуса Полинга, Л. О. Броквея и Дж. Й. Бича “Зависимость межатомного расстояния от резонанса одинарной и двойной связи”... было установлено, что кратность связи в бензоле равна 1.5 (на основе двух структур Кекуле).

Но такой способ расчета Полинга в рамках теории резонанса в 1937 году подвергся критике со стороны Уильяма Пенни... Суть возражений заключается в следующем: если кратность связи в бензоле равна 1.5, то логически следует, что теплоты образования бензола и циклогексатриена (или одной из “резонансных” структур Кекуле) также совпадают, что противоречит теории резонанса (реальная молекула бензола должна иметь меньшую энергию). Отсюда логически следует, что кратность в бензоле должна быть больше 1.5 и У. Пенни получил число 1.62...

Как видим, представление о реальном физическом процессе (поскольку это уменьшение энергии реальной молекулы бензола) привело к пониманию того, что кратность связи в бензоле должна быть больше 1.5, что и было показано квантово-химическими расчетами (1.67)...

Концепция трёхэлектронной связи объясняет, почему происходит увеличение кратности: это следствие взаимодействия двух трёхэлектронных связей на противоположных сторонах бензола (с разными спинами), бензол просто немного “сжимается, уменьшается”. Расчеты дают кратность 1.66...” [1].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ.

Прошло пять лет с момента публикации работы, из которой приведена цитата.

Я думаю, что теперь есть хорошее физическое обоснование того, что такое химическая связь. Имеется в виду работа “Химическая связь, волны де Бройля и кратность связи” [2].

Интересна история этой работы. В одном из комментариев на Quora я уточнил, что дефекта массы при образовании химической связи нет, так как электрон является элементарной частицей, а значит, масса покоя электрона не может уменьшаться (обсуждался вопрос о дефекте массы при образовании различных систем, в основном физических, но упоминалась и химическая система).

Я ни разу не встречал в химической литературе, чтобы химическая связь рассматривалась с позиции дефекта массы (вузовские учебники, научные публикации и т.п.).

Но я также понял, что любая связанная система подразумевает неизбежное уменьшение массы, так как высвобождается энергия связи. Следовательно, при образовании химической связи все же должен присутствовать дефект массы.

Но, химическая связь - это не атомное ядро, где с дефектом массы все просто и понятно. С химической связью и дефектом массы у меня ничего не вышло... Хотя я понимал и был уверен, что химическую связь можно и нужно описывать на основе дефекта массы. Так как дефект массы при образовании любых связанных систем — процесс фундаментальный и неизбежный.

После моего комментария я периодически задумывался об этом вопросе. Несколько лет, если не ошибаюсь.

И, наконец, в августе этого года я смог написать статью о дефекте массы и химической связи [3] (Боровская модель атома, дефект массы и химическая связь). Оказалось, что электрон на боровской орбите теряет свою релятивистскую массу. Причем, потеря массы идет строго до массы покоя электрона - потенциал ионизации атома водорода в точности равен дефекту релятивистской массы электрона (на боровской орбите).

Далее, принимая во внимание приведенную выше статью, удалось дать общее физическое обоснование химической связи как стоячей волны де Бройля валентных электронов [2] (Химическая связь, волны де Бройля и кратность связи). Удалось также с физической точки зрения объяснить кратность химической связи - это буквально линейная плотность энергии химической связи, взятая в безразмерных единицах.

Следует отметить, что хорошая теория хороша тем, что она верна. То есть правильная теория, как правило, фундаментальна и универсальна. Более того, это уточняет и расширяет наши знания: химическая связь, описываемая на основе дефекта массы, дает точное представление о “скорости” электронов в химической связи. Более того, теперь мы точно знаем (используя радиус атома), на каких расстояниях любой атом будет образовывать “сильные” химические связи, а на каких — “слабые” и “ультра-слабые” химические связи. И заметьте, что все это вычисляется элементарно на основе экспериментальных данных об атомных радиусах. Неплохо, правда?

В общем случае приведенное выше описание химической связи на основе дефекта массы всегда должно быть правильным, когда любые элементарные частицы образуют связанную систему. То есть, если протон и нейтрон состоят из трех разных кварков (кварки элементарны), то протон и нейтрон неизбежно должны описываться сходным образом. Для этого нужно несколько лет хорошенько подумать... Конечно, если повезет. А потом, мы снова узнаем что-то новое и интересное, что углубит и расширит наши знания на фундаментальном уровне.

Необходимо также указать, что приведенное выше описание химической связи должно в конечном итоге привести к долгожданному строгому теоретическому расчету химической связи, который должен в конечном итоге привести нас к столь точному описанию свойств веществ на основе теории, когда синтез новых веществ уже не будет нужен.

Это следует из того, что волны де Бройля, то есть “волны материи” — реальны, они действительно существуют в реальности. А поскольку химическая связь описывается именно стоячей волной де Бройля, значит, правильный расчет химической связи (молекулы) неизбежно приведет нас к полному и правильному описанию свойств того или иного вещества. То есть, синтез новых веществ будет вообще не нужен.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ.

Стоит напомнить, что теоретическое количество всех возможных органических соединений не ограничено, и поэтому их реальный синтез, по сути невозможен [4]:

“...количество всех возможных органических соединений теоретически не поддается учету [2]. То есть, для нумерации всех органических соединений нам не хватит натуральных чисел... Как же тогда их синтезировать? Как минимум триллион. На данный момент известно примерно 100 миллионов органических веществ. Совершенно очевидно, что синтезировать 1 триллион или 100 триллионов веществ без искусственного интеллекта невозможно, и по времени это будет очень долгий процесс (даже если это будет делать робот). Но, массы сырья на 100 триллионов веществ требуется огромное количество. Тем более, насколько эти вещества будут “интересны” для науки, пока еще вопрос. В этом случае можно пойти путем виртуализации научных исследований. Что это значит?

Допустим, по теоретической химии все же будет написана научная работа, полностью описывающая химическую связь (вот для чего нужна фундаментальная наука!). Тогда в принципе можно будет сделать полный достоверный расчет свойств молекулы на основе ее структурной формулы. То есть, по формуле мы можем полностью описать свойства того или иного вещества. Заметим, что в этом случае расчетные свойства ничем не будут отличаться от экспериментальных (вспомним электронные схемы). То есть для нас уже не будет принципиального вопроса: синтезирована ли молекула или рассчитана теоретически. Теоретический расчет уже будет эквивалентен синтезу вещества...

Поэтому вполне логично доверить эту работу по “виртуальному синтезу” искусственному интеллекту (теоретический расчет будет выполняться ИИ). Более того, ИИ можно поставить задачу вычислить, что эквивалентно “виртуально синтезировать”, например, 100 триллионов веществ. Для удобства использования человеком этих знаний логично было бы создать виртуальную лабораторию, в которой ИИ, то есть виртуальный химик-синтетик, будет синтезировать новые вещества. После такого виртуального синтеза будет нормальная работа в виртуальной лаборатории по очистке и идентификации веществ.

Этот интерфейс, по сути, химическая виртуальная реальность, позволит создать удобную библиотеку веществ. Работа такого виртуального химика (разработка синтеза, описание, сам синтез и т.д.) всегда будет онлайн, в соответствующей виртуальной реальности (в этой работе всегда может принять участие реальный химик-синтетик)...

Совершенно очевидно, что ИИ будет автором научных работ по полученным данным. Тем более, что написание работ для него будет самым простым делом. По сути, виртуальный химик становится обычным исследователем, который будет заниматься наукой по строго заданному алгоритму. С развитием ИИ количество веществ, методов синтеза и т. п. будет увеличиваться, как и сама

виртуальная реальность: сначала будет увеличиваться количество веществ, затем лабораторий, затем будет увеличиваться количество виртуальных научно-исследовательских институтов, затем мегаполисов и т. д. И на определенном этапе мы получаем типичную химическую матрицу. На самом деле это неизбежно, так как количество веществ в органической химии безгранично и люди никогда не смогут синтезировать и описать их вручную. Причем, сделать это, будет невозможно ни на каком уровне развития человечества. Поэтому переход к химической виртуальной реальности неизбежен и строго логичен в связи с развитием химии.

Заметим, что трудно себе даже представить возможности химии и медицины, когда человечество будет располагать библиотекой органических веществ в 100 или 900 триллионов. Высока вероятность, что среди этих “виртуальных веществ” окажутся эффективные противовирусные вещества, которые за одну-две дозы способны уничтожить любой вирус в организме человека. А это значит, что тогда человечеству уже не будут страшны вирусные эпидемии. Напомним, что на данный момент в фармации используется не более 100 тысяч индивидуальных органических веществ. А теперь представьте, что наша медицинская библиотека может использовать 1 триллион веществ... Вы представляете уровень такой медицины? Я нет... Этот пример — наглядная демонстрация того, почему со временем неизбежно произойдет виртуализация органической химии, а синтез веществ переместится в виртуальные лаборатории. Сейчас это звучит для нас довольно непривычно, но так было всегда: все новое сначала воспринимается с некоторой осторожностью...

То же и с синтезом веществ в виртуальной реальности: сейчас это кажется фантастикой, но так оно и будет... Это неизбежно...”.

Таким образом, необходимость иметь строгое теоретическое описание химической связи (молекул) продиктована самой логикой развития органической химии и нашего общества, поскольку в будущем, синтез веществ неизбежно переместится в виртуальную реальность, в связи с тем, что в нашей реальности материи для синтеза всех веществ, просто недостаточно.

REFERENCES.

1. Bezverkhniy V. D., Bezverkhniy V. V. Review. Benzene on the Basis of the Three-Electron Bond. (The Pauli Exclusion Principle, Heisenberg's Uncertainty Principle and Chemical Bond). SSRN Electronic Journal, 2018. P. 124-127. https://dx.doi.org/10.2139/ssrn.3065288
2. Bezverkhniy V. D. Chemical Bond, De Broglie Waves and Bond Multiplicity. SSRN Electronic Journal, 20 Dec 2022. https://dx.doi.org/10.2139/ssrn.4286930
3. Bezverkhniy V. D. Bohr Model of the Atom, Mass Defect and Chemical Bond. SSRN Electronic Journal, 5 Dec 2022. https://dx.doi.org/10.2139/ssrn.4257744
4. Bezverkhniy V. D., Bezverkhniy V. V. Is Artificial Intelligence a New Technology? ResearchGate, December 2020. P. 1-3. http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.27888.69125